

Název práce: Studium vakancí v Fe-Al slitinách

Autor: RNDr. František Lukáč

Katedra: Katedra fyziky nízkých teplot

Vedoucí disertační práce: doc. Mgr. Jakub Čížek, Ph.D., Katedra fyziky nízkých teplot, Matematicko-fyzikální fakulta

Abstrakt: Zliatiny Fe-Al sa vyznačujú relatívne vysokou koncentráciou vakancií, ktoré majú zásadný vplyv na mechanické vlastnosti týchto zliatin. Pomocou pozitronovej anihilačnej spektroskopie bola metódami merania doby života pozitronu a difúznej dĺžky implantovaných monoenergetických pozitronov určená koncentrácia vakancií v zliatinách Fe-Al. Pozorovaná korelácia medzi tvrdosťou a koncentráciou vakancií bola charakterizovaná určením vytvrdzovacieho koeficientu vakancií v Fe-Al zliatinách. Žiňaním pripravených vzoriek zliatin Fe-Al s rôznym zložením bol porovnaný teplotný vývin koncentrácie vakancií s vývinom tvrdosti zliatin. Metódou koincidenčného merania Dopplerovského rozšírenia anihilačného píku bolo charakterizované chemické okolie vakancií v zliatinách Fe-Al. Zvýšený obsah Al v okolí vakancie bol prisúdený príťažlivej interakcii medzi atómami Al a vakanciou. Pomocou kvantovo mechanických *ab initio* výpočtov boli vysvetlené namerané charakteristiky pozitronovej anihilácie v materiále Fe-Al. Relaxácia iónov v okolí vakancií má výrazný vplyv na dobu života pozitronov zachytených vo vakanciách. Zahrnutie relaxácie iónov do výpočtov doby života pozitronu výrazne zlepšilo súhlas vypočítaných dôb života s experimentom.

Klíčová slova: Fe-Al slitiny, intermetalika, vakance, anihilace pozitronů